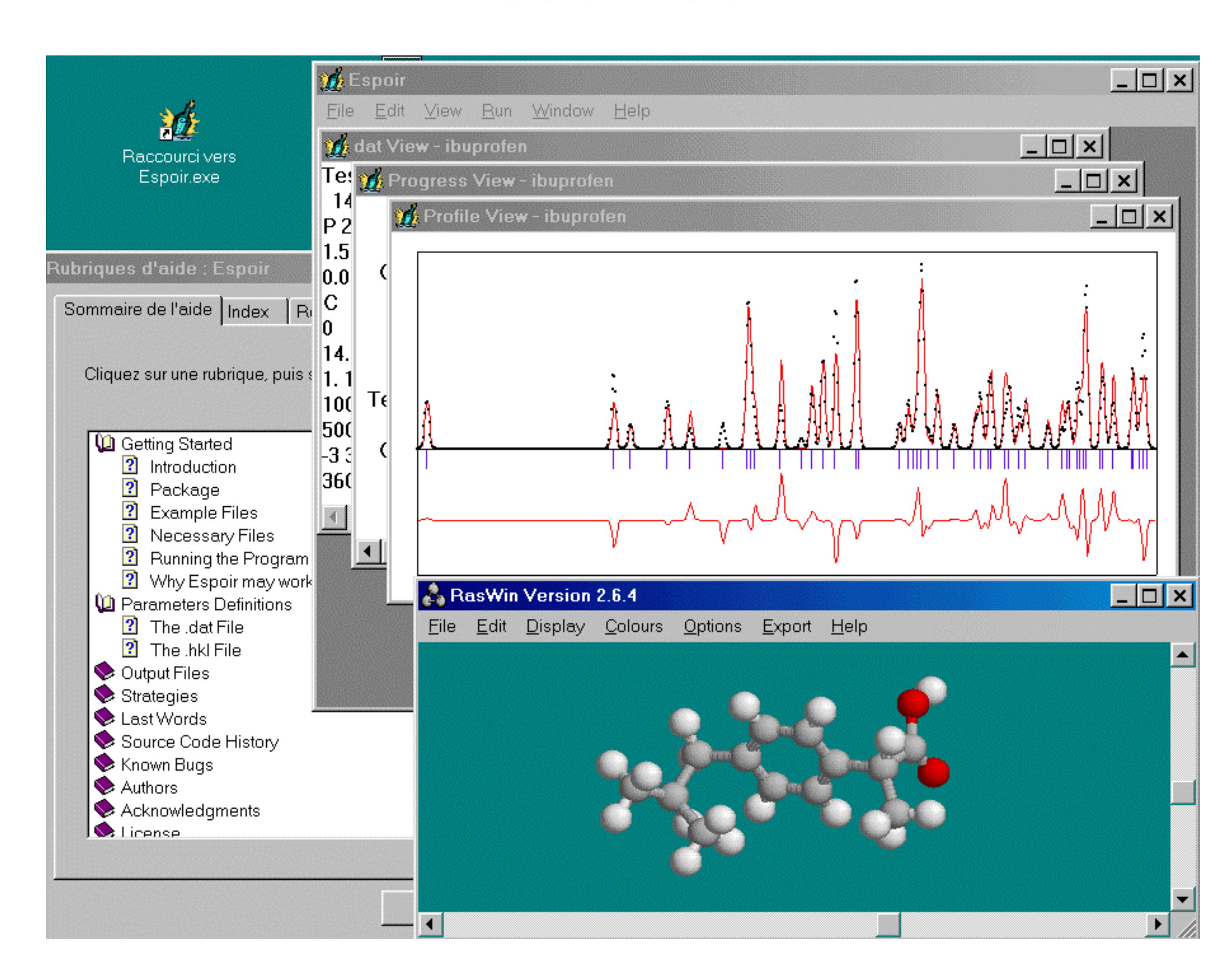
Armel Le Bail
DR2 - Matricule 51892 - Section 19
Laboratoire des Fluorures - CNRS ESA 6010
Université du Maine, Faculté des Sciences
Avenue Olivier Messiaen
72085 LE MANS Cedex 9
☎ (33) 02 43 83 33 47
Fax (33) 02 43 83 35 06
E-mail alb@cristal.org
Web http://www.cristal.org/

Mai 2001

RAPPORT D'ACTIVITE

¾ ¾ ¾ ¾ ¾ ¾

1999-2001



ESPOIR : un programme pour déterminer les structures cristallines par méthode Monte Carlo en diffractométrie des poudres.

Index

Les recommandations pour la rédaction du rapport d'activité ont été suivies à la lettre.

I - Curriculum-Vitæ

Age : 50

Diplômes : Doctorat de 3éme Cycle (1976, Rennes), Doctorat D'Etat (1985, Le Mans).

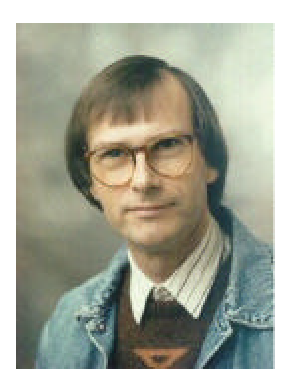
Carrière hors CNRS : 1977-1981, Maître-Assistant à l'Université d'ORAN.

Carrière au CNRS : Octobre 1981, Attaché de Recherche ; Octobre 1985, Chargé de Recherche 1C ; Octobre 1990, Directeur de Recherche 2C.

Hébergé par : Université du Maine, Laboratoire des Fluorures, appellations CNRS successives : ERA 609, URA 449, ESA 6010, UMR 6010.

Mobilité thématique :

	publications
1976-2001 Réseaux imparfaits (taille, distorsion)	15
1976-2001 Programmation FORTRAN	30
1981-2001 Verres fluorés, amorphes	21
1981-2001 Cristallochimie de fluorures	39
1981-2001 Diffusion X et/ou neutrons par les amorphes	18
1981-1988 EXAFS	10
1983-2001 Modélisation de la structure des amorphes	9
1983-2001 Rietveld appliqué aux rayons X ou neutrons	52
1987-2001 Détermination de structure (monocristaux)	27
1987-2001 Détermination de structure *ab initio* sur poudre	31
1988-1995 Cristallochimie des échanges Li/H dans les oxydes	5
1988-2001 Cristallochimie de phosphates	19
1988-2001 Cristallochimie d'oxydes de cuivre, palladium...	13
1988-1996 Problèmes de maclage	8
1989-1995 Grandes mailles, superstructures	6
1990-1998 Synthèse hydrothermale	11
1996-2001 VRML (Virtual Reality Modeling Language)	5
1997-2001 Reverse Monte Carlo, recuit simulé	4
1999-2001 Enseignement à distance	2



Activités d'enseignement : Créateur et président du jury du Diplôme d'Université «Structure Determination by Powder Diffractometry», en EAD (Enseignement à Distance) : dix huit étudiants de niveau PhD ou post-doc inscrits en 1999-2001.

II - Travaux et Objectifs

II-A - Activité au cours des deux dernières années

II-A-1 - Résultats obtenus

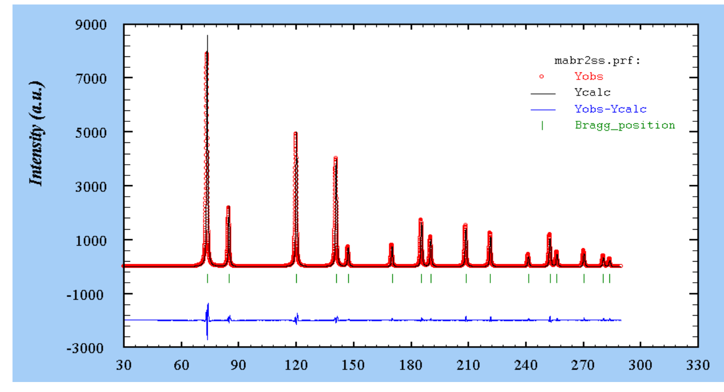
II-A-1-a - Programme ESPOIR

Le volume principal d'activité dans la période 1999-2001 a été consacré à la mise au point d'ESPOIR, un logiciel pour déterminer les structures cristallines par méthode Monte Carlo en diffractométrie des poudres. La première version d'ESPOIR (0.9) était téléchargeable dès avril 1999, présentée au XVIIIth Congrès de l'IUCr en août 1999 à Glasgow. Une version 3 était proposée au congrès EPDIC 7 de Barcelone en mai 2000. La version 3.5 actuelle bénéficie d'un interface graphique pour Windows. L'historique de l'évolution du programme est disponible sur le site Web : http://sdpd.univ-lemans.fr/sdpd/espoir/

Le projet a été sponsorisé par la Compagnie Dupont de Nemours à hauteur de 10000 US$ en 2000 et autant en 2001. Ceci a permis, entre autres, d'engager sur deux mois (juin-juillet 2000) un stagiaire de niveau licence de l'IUP MIME de l'Université du Maine pour réaliser une interface utilisateur graphique (voir page de garde du rapport), tandis qu'une version tournant sur calculateur parallèle était proposée en mars 2001 (collaboration avec F. Calvayrac, principal concepteur de cette version testée au Mans sur machine Beowulf). Les améliorations algorithmiques apportée à la dernière version 3.5 sont conséquentes, incluant une reconnaissance automatique des angles de torsion des molécules et la création d'animations des évènements Monte Carlo acceptés au cours de la détermination de structure. Ce programme, distribué sous licence GPL (Gnu Public Licence), apparaît aujourd'hui concurrenciel, d'un point de vue graphique et facilité d'emploi, face aux poids-lourds du domaine privé tels que PowderSolve (MSI), Endeavour (Crystal-Impact) ou DASH (CCDC) qui sont hors de prix (20000 à 50000F pour une version monoposte, en offre académique). ESPOIR représente une alternative efficace destinée aux chercheurs académiques peu argentés.

II-A-1-b - Réseaux imparfaits (taille, distorsion)

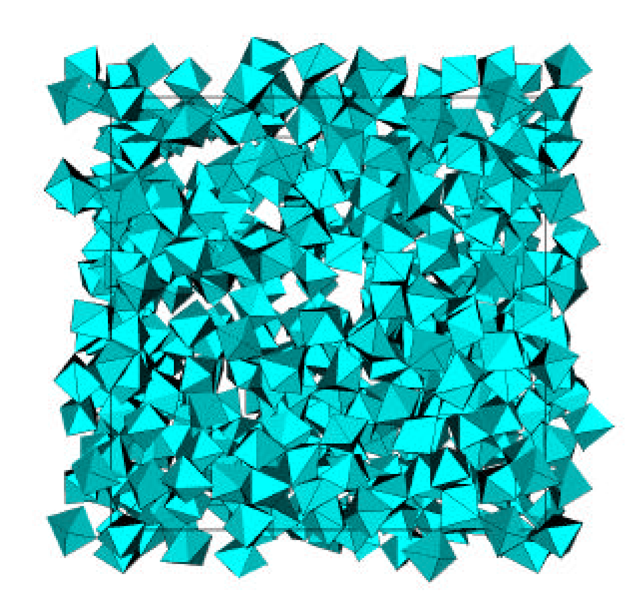
Sortie en 1999 du livre aux Editions Oxford "Defect and Microstructure Analysis by Diffraction" dans lequel je contribue pour un chapitre : "Anisotropic size/microstrain in Rietveld analysis". Sortie également en 1999 des proceedings de DXC-98 (47th Annual Denver Conference), avec pour titre de la contribution : "New developments in microstructure analysis via Rietveld refinements". Invitation au Sixth International School and Workshop of Crystallography, 22-27 Janvier 2000, Ismailia, Egypte, avec pour titre «Advances in microstructure analysis by the Rietveld method». Plusieurs de ces conférences sont en ligne sur Internet, avec texte et transparents. Une contribution au SIZE/STRAIN Round Robin organisé en 2000 par la CPD (Commission of Powder Diffraction de l'IUCr) est déjà consultable sur Internet.



Size/Strain Round Robin : Diagramme de diffraction synchrotron (ESRF-BM16) d'un échantillon de CeO_2. Modèlisation de l'effet de taille des grains et de distorsion du réseau cristallin par la méthode de Rietveld (programme ARIT).

II-A-1-c - Verres fluorés, amorphes

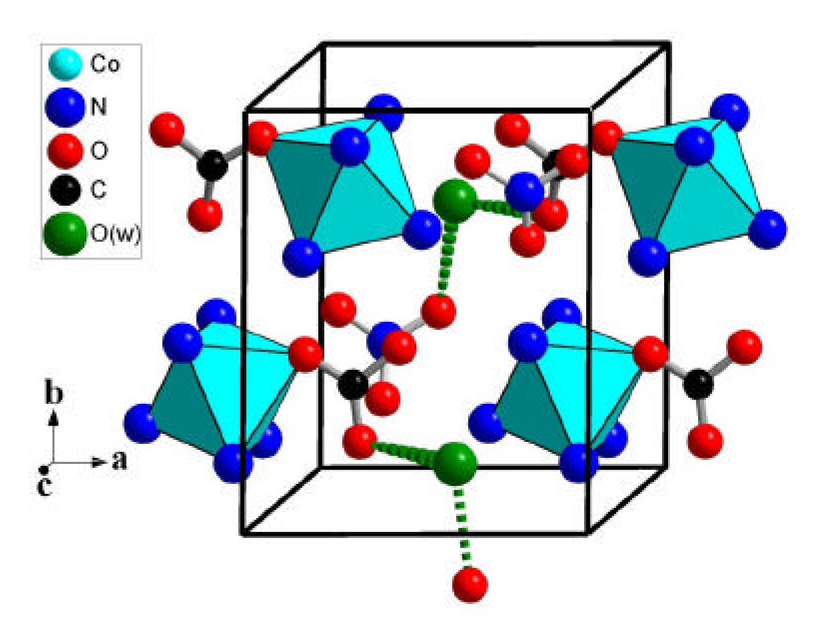
Les toutes dernières publications dans ce thème s'attachent à modéliser des verres de formulation "$NaPbM_2F_9$" (M=Fe, V) par Reverse Monte Carlo (RMC) et méthode de Rietveld (logiciel ARITVE), ainsi que $ZnCl_2$ amorphe. Un article compare les méthodes RMC et RDM (Rietveld for Disordered Materials). Une invitation à donner une conférence au Sixth International School and Workshop of Crystallography, 22-27 Janvier 2000, Ismailia, Egypte, est à signaler, avec pour titre « Combining the Reverse Monte Carlo and the Rietveld Methods for Amorphous Materials Structure Modelling ».



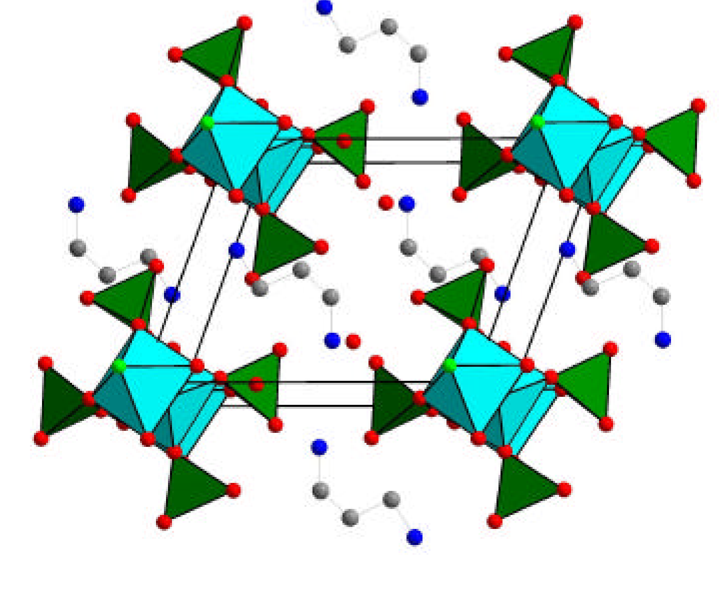
Verre fluoré "$NaPbM_2F_9$" (M = Fe, V) modèlisé par RMC. 300 octaèdres MF_6 dans un cube de paramètre 30Å

II-A-1-d - Détermination de structure *ab initio* sur poudre

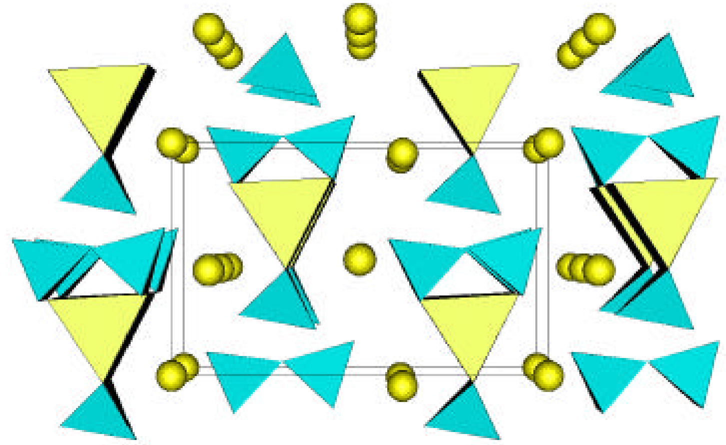
A signaler des collaborations nouvelles avec la Chine pour $[Co(NH_3)_5CO_3]NO_3 \bullet H_2O$, avec la Tunisie par l'intermédiaire de Y. Laligant pour $CdBa_2(P_2O_7)(HPO_4)$, et avec l'Angleterre pour $Ga(HPO_4)_2F \bullet H_3N(CH_2)_3NH_3 \bullet 2H_2O$.



Projection de la structure de $[Co(NH_3)_5CO_3]NO_3 \bullet H_2O$

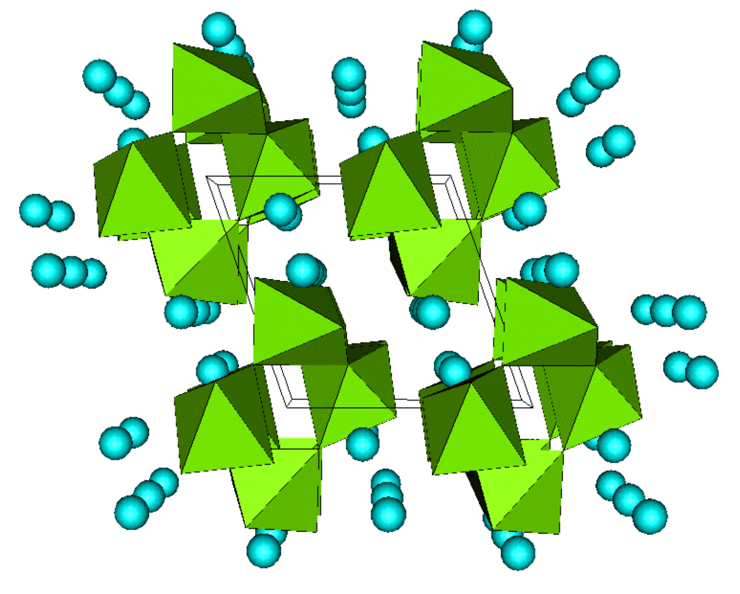


Projection de la structure de $Ga(HPO_4)_2F{\bullet}H_3N(CH_2)_3NH_3{\bullet}2H_2O$



Projection de la structure de $CdBa_2(P_2O_7)(HPO_4)$

Les applications du logiciel ESPOIR ne se limitent pas à la localisation de molécules de forme connue au préalable, mais les structures peuvent aussi être déterminées à partir d'un modèle de départ complètement désordonné (mode « scratch »). C'est ainsi que la structure de $La_2W_2O_9$ a été résolue à partir d'une combinaison des données de diffraction X et neutron sur poudre (publication à paraître).



Projection de la structure de $La_2W_2O_9$

II-A-2 - Difficultés rencontrées

Absolument considérables.

II-B - Objectifs et projets pour les deux prochaines années

Objectifs : diffractométrie des poudres, se maintenir au top de cette spécialité, contribuer à la faire évoluer et à se répandre (il semble bien que le principal de l'expansion actuelle concerne la chimie organique et en particulier la caractérisation de produits pharmaceutiques, ce qui déborde de la Section 19 du CNRS…). Une continuation des activités dans le domaine de la modèlisation de structure des amorphes est aussi très probable. Ces projets passent sans aucun doute par le développement de nouvelles méthodes, de nouveaux algorithmes, aussi par la maintenance et l'amélioration des anciennes méthodes, et sont indissociables d'efforts à réaliser en programmation de logiciels pour la cristallographie. Il n'est pas possible de laisser des compagnies privées (MSI, Crystal Impact, Oxford Cryosystem, etc) verrouiller complètement ce secteur et transformer les laboratoires de recherche académique en vaches à lait. Concernant les obligations de transmission du savoir, l'Université du Maine voit perdurer la décrue dans les inscriptions en license de chimie en présentiel, tandis que 19 étudiants sont inscrits dans la nouvelle licence en EAD (Enseignement à Distance). Un seul étudiant est inscrit en DEA en 2000-2001 dans l'option Chimie du Solide du DEA de chimie de l'Université du Maine (contre une douzaine au total dans les deux autres options, polymères et chimie fine)… Il est donc encore une fois bien peu probable que vous me voyiez diriger prochainement une thèse (j'estime de toutes façons être trop spécialisé pour diriger une thèse de chimiste généraliste). Mais si les inscriptions au Diplôme d'Université en EAD « SDPD Internet Course » se maintiennent dans les années qui viennent, je ne devrais pas manquer de contacts virtuels avec de nombreux étudiants de niveau PhD et post-doctorants. Maintenir au plus haut niveau un tel enseignement à distance n'est pas une mince affaire, dans la mesure où il s'agit essentiellement d'une formation pratique basée sur l'utilisation de logiciels constamment en évolution, sans parler de la naissance permanente de nouveaux procédés. Plus de 2000000 de requêtes de fichiers sur mon site Web de cristallographie et ses miroirs, depuis cinq ans de mise en service. L'objectif est de maintenir et actualiser la banque de données SDPD, animer la liste de discussion du même nom (http://www.cristal.org/sdpd/). Sur le plan de la prospective en chimie, quelles seront les formulations et les propriétés des fluorures et oxydes dont je ne manquerai certainement pas de déterminer les structures cristallines dans les années qui viennent, je ne saurais le dire.

II-C - Place des recherches dans celles de l'unité

La liste de mes publications peut être consultée dans le contexte des 600 et quelques publications du Laboratoire des Fluorures mises en ligne par mes soins à http://www.cristal.org/perl/pubfluo.html, avec moteur de recherche par mots-clés. Ce contexte peut même être étendu à la Faculté des Sciences de l'Université du Maine dans son entier. Une analyse bibliométrique au moyen du Web of Science (ISI) est disponible à l'adresse : http://sdpd.univ-lemans.fr/lemans/. La liste complète des références bibliographiqes produites sous l'adresse de l'Université du Maine (2806 articles), extraite du Science Citation Index, montre que l'article le plus cité dans la période 1975-2001 n'est autre que:

Author(s): LE BAIL A; DUROY H; FOURQUET JL
Title: Ab initio structure determination of $LiSbWO_6$ by X-ray powder Diffraction
Source: MATERIALS RESEARCH BULLETIN 1988, Vol 23, Iss 3, pp 447-452
Times Cited: 293

Il s'agit de l'article présentant la première application d'une méthode d'extraction des amplitudes des facteurs de structure d'un diagramme de diffraction par une poudre, désignée depuis par « Le Bail method ».

II-C-1 – Place des recherches du point de vue des thématiques

Les thèmes de recherche officiels du Laboratoire des Fluorures se définissent comme suit :

Thème I – Elaboration, caractérisation et modélisation des fluorures cristallisés.
Thème II - Les verres fluorés : Les guides d'onde planaires pour l'optique active, étude de l'ordre local par spectroscopie RPE et RMN
Thème III - Synthèse par voies non conventionnelles et caractérisation d'oxydes d'éléments de transition à propriétés spécifiques

Si l'on rencontre dans le désordre les termes « verre fluoré », « oxyde », « modélisation » dans les sujets de mes travaux de recherche, il n'est cependant pas évident de les incorporer précisément dans l'un ou l'autre des trois thèmes définis ci-dessus.

II-C-2 Place des recherches du point de vue des équipes

Au Laboratoire des Fluorures, un thème = une équipe avec un responsable. Aucun de mes articles n'est cosigné par ces responsables. J'avoue ne pas travailler réellement en relation étroite avec ces équipes officielles.

II-D - Mobilités

Néant

III - Production scientifique depuis 2 ans

1 - Revues à comité de lecture

1- "Reverse Monte Carlo and Rietveld Modelling of the $NaPbM_2F_9$ (M = Fe, V) Fluoride Glass Structures." A. Le Bail, *J. Non -Cryst. Solids* **271**, 249-259 (2000).

2- "Structure of $[Co(NH_3)_5CO_3]NO_3{\bullet}H_2O$." J.H. Zhu, H.X. Wu and A. Le Bail, *Solid State Science* **1**, 55-62 (1999).

3- "Ab initio structure determination of lanthanum cyclo-tetratungstate α-$La_2W_2O_9$ from X-ray and neutron powder diffraction." Y. Laligant, A. Le Bail and F. Goutenoire, J. Solid State Chem. In press.

4- "Investigation of mixed divalent cation phosphates: synthesis and X-ray powder structure determination of $CdBa_2(P_2O_7)(HPO_4)$. L. Ben Taher, L. Smiri, Y. Laligant and A. Le Bail, *Solid State Sciences* **2**, 285-292 (2000).

5- "The room-temperature crystallisation of a one-dimensional gallium fluorophosphate, $Ga(HPO_4)_2F.H_3N(CH_2)_3NH_3{\bullet}2H_2O$, a precursor to three-dimensional microporous gallium fluorophosphates." R.I. Walton, F. Millange, D. O'Hare, A. Le Bail, T. Loiseau, C. Serre, G. Férey, Chem. Comm. 3, 203-204 (2000).

2 - Conférences invitées dans les congrès

1- XVIIIth IUCr Congress & General Assembly, 4th-13th August 1999, Glasgow, Scotland . Structure Solution from Powder Diffraction Data Workshop. "The Practice of "|Fobs|" Extraction from Powder Diffraction Data".
Conférence en ligne à : http://www.cristal.org/glasgow/index.html

2- Kunming IUCr Workshop, China, July 1999. "Structure Determination by Powder Diffractometry".
Conférence en ligne à : http://sdpd.univ-lemans.fr/kunming/index.html





3– Sixth International School and Workshop of Crystallography, 22-27 January 2000, Ismailia, Egypt. "Combining the Reverse Monte Carlo and the Rietveld Methods for Amorphous Materials Structure Modelling".
Conférence en ligne à : http://www.cristal.org/egypte/conf1/index.html

4– Sixth International School and Workshop of Crystallography, 22-27 January 2000, Ismailia, Egypt. "Advances in Microstructure Analysis by the Rietveld Method".
Conférence en ligne à : http://www.cristal.org/egypte/conf2/index.html

5– 20th European Crystallographic Meeting, ECM 20, August 25-31, 2001, Kraków, Poland. "Stucture determination by powder diffractometry : Distance teaching and distance learning."

3 - Proceedings à comité de lecture

1- "New developments in microstructure analysis via Rietveld refinements." A. Le Bail, *Advances in X-ray Analysis*, Vol. **42**., 191-203 (2000).

1- "ESPOIR : A Program for Solving Structures by Monte Carlo from Powder Diffraction Data." A. Le Bail, *Mat. Sci. Forum*, in press.

1- "Structure Determination by Powder Diffractometry : Internet Course." A. Le Bail, Y. Laligant and A. Jouanneaux, *Mat. Sci. Forum*, in press.

1- "Trends in structure determination by powder diffractometry." A. Le Bail, *Advances in Stucture Analysis*, in press.

4 - Publications dans des revues sans comité

1- "Combining the Reverse Monte Carlo and the Rietveld Glass Structure Modelling Methods." A. Le Bail, The Chemistry Preprint Server, CPS: inorgchem/0008001 (2000), http://preprint.chemweb.com/

2- "Revisiting the 1998 SDPD Round Robin." A. Le Bail and L.M.D. Cranswick, IUCr CPD Newsletter 25, in press.

2- "The powder diffraction handicap." A. Le Bail, *IUCr Newsletter* **7, N°4**, p. 4.

2- "Solving structures by reverse Monte Carlo from scratch." A. Le Bail, *CPD Newsletter* **21**, 13-14 (1999).

5 - Communications à des congrès, symposium

- XVIIIth IUCr Congress & General Assembly, 4th-13th August 1999, Glasgow, Scotland . "Does conventional powder diffraction beat a synchrotron ?".
Poster en ligne à : http://www.cristal.org/glasgow/poster/glasgowposter.html

- EPDIC-7 – 7th European Powder Diffraction Conference – Barcelona, 20-23 May 2000. "ESPOIR : A Program for Solving Structures by Monte Carlo from Powder Diffraction Data."
Poster en ligne à : http://www.cristal.org/epdic-7/poster1/index.html

- EPDIC-7 – 7th European Powder Diffraction Conference – Barcelona, 20-23 May 2000. "Structure Determination by Powder Diffractometry : Internet Course."
Poster en ligne à : http://www.cristal.org/epdic-7/poster2/index.html

6 - Séminaires, workshops

Participations comme conférencier invité, voir en 2), page précédente.

7 - Chapitres dans les ouvrages

- "Accounting for size and microstrain in whole-powder pattern fitting." A. Le Bail, in : Defect and Microstructure Analysis by Diffraction, R. Snyder, J. Fiala & H. Bunge Editors, Oxford Science Publications, Chapter 22, 535-555 (1999).

8 - Livres et ouvrages

Néant

9 - Brevets

Néant

10 - Logiciels

ESPOIR : voir http://sdpd.univ-lemans.fr/sdpd/espoir/

11 – Autres : Publications Electroniques

Il s'agit ci-dessous de la liste des nouveautés ajoutées au site Web, année après année. On y trouve des didacticiels, des posters, des conférences complètes (texte et transparents), des logiciels avec manuel d'utilisation, de vrais publications dans des journaux purement électroniques, avec referees, des bases de données avec moteur de recherche par mots-clés, des compte-rendus de contribution à des Round Robin en cristallographie. Voir l'équivalent électronique de cette page, avec liens hypertextes à l'URL : http://www.cristal.org/new.html

2000

- Contributions to the chemistry preprints server http://preprint.chemweb.com/
- Liste de discussion : REcherche SCIentifique Française (RESCIF)
- A new tutorial for speeding up ESPOIR use
- Contribution to the Size/Strain Round Robin with program ARIT
- K-alpha : believe your eyes or trust mathematics
- Contributions to EPDIC-7, Barcelona, 20-23 May 2000 : poster 1 (or preprint) and poster 2 (or preprint)
- ESPOIR 3.50 now driven by a Windows GUI. It can locate up to 6 independent molecules by Monte Carlo from powder diffraction data. Torsion angles are automatically located and possibly varied (recent developments sponsored by the DuPont Company) – GNU Public License
- Contributions to the Sixth International School and Workshop of Crystallography, 22-27 January 2000, Ismailia, Egypt : conference 1 and conference 2

1999

- CrySoCoM : Crystallography Source Code Museum
- PowBase : a free-access database of raw powder patterns
- SDPD Internet Course : learn to determine a crystal structure from powder diffraction data
- Webcam of the University of Maine, Sciences Faculty
- Contributions to IUCr XVIIIth, Glasgow, Scotland : Workshop on structure solution from powder data, computer Fayre, and poster
- Contribution to the Kunming (China) workshop on structure determination and refinement from powder data
- In french : Succès-échecs, des dossiers gagnants, ou perdants, ou même gagnants-perdants ! N'hésitez plus à contribuer.
- New Reverse Monte Carlo code for ab initio structure determination from powder diffraction data : ESPOIR 0.9 and then ESPOIR 1.0, and now ESPOIR 2.0 allowing molecule location
- Personal research report for 1995-99 as MS Word 97 .doc files, zipped, in french, of course
- Birth of the SDPD Mailing List
- Authors versus number of Rietveld-refined structures in ICSD and the sub-populations working with neutrons, conventional X-ray and synchrotron radiation
- Authors versus number of structures in ICSD (first 1000, or all)
- This Web site mirrored in Australia

IV - Autres activités liées au métier de chercheur depuis 2 ans

IV-A - Enseignement et diffusion de l'information scientifique et technique

IV-A-1 - Sujets des thèses dirigées (avec indication du pourcentage de co-direction)

Néant

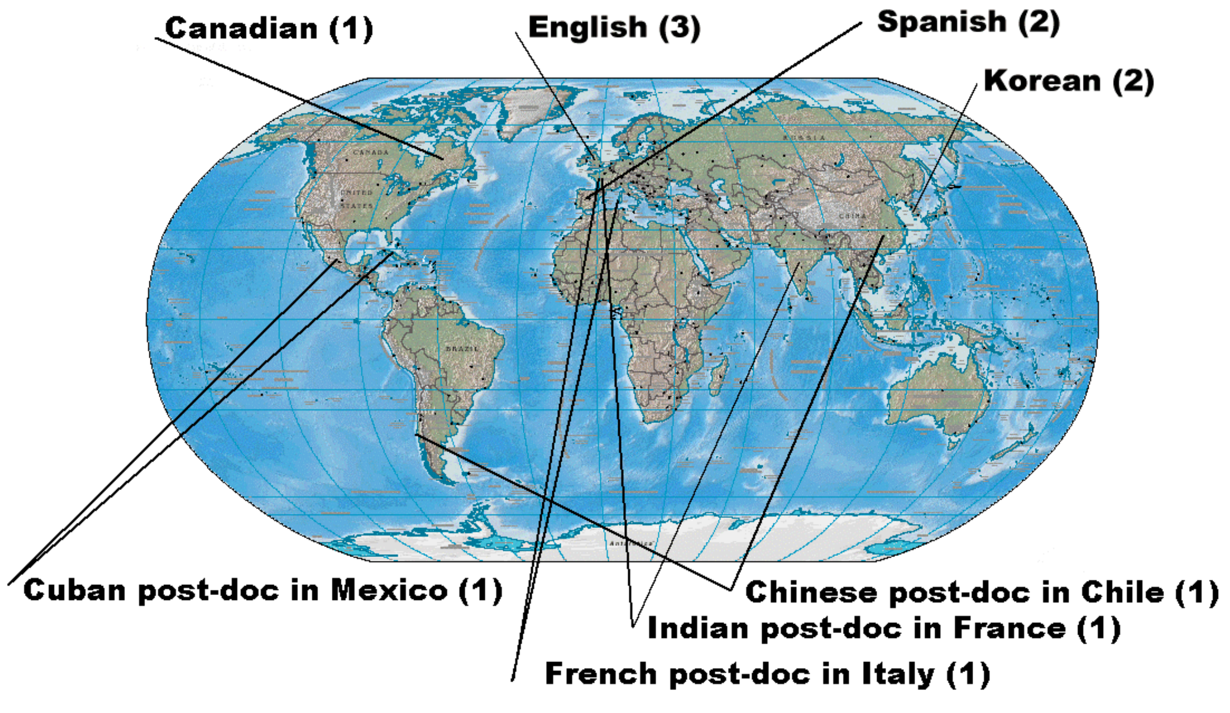
IV-A-2- Participation à l'enseignement (préciser le niveau et nombre d'heures annuel)

IV-A-2-a -

DEA Sciences Chimiques - Option Chimie du Solide
Module 2 : Diffractométrie des Poudres : 15 heures

IV-A-2-b -

Diplôme d'Université "Structure Determination by Powder Diffractometry"
Niveau 3ème cycle
Enseignement à distance : 5 heures équivalent TD par étudiant, soit en 1999-2000 : 60 heures pour 12 étudiants ; en 2000-2001 : 6 étudiants inscrits pour l'instant.



Le succès du DU (Diplôme d'Université) "**Structure Determination by Powder Diffractometry**" se confirme. L'offre a séduit 12 clients en 1999-2000, de niveau PhD, post-doc ou professionnel, dont un seul Français. Le cours (SDPD Internet Course http://sdpd.univ-lemans.fr/course/) est à la pointe des technologies de l'information puisqu'il n'est distribué que par correspondance sur Internet. Il se déroule en mode asynchrone, l'inscription est donc possible à tout instant. Après un an de rodage, l'Université du Maine a décidé de faire droit à ma demande de prise en compte du suivi des étudiants de ce DU sur la base de 5 heures ETD (Equivalent Travaux Dirigés) par étudiant (cf. copie de la

lettre page 21). Les trois instructeurs du cours (Y. Laligant, chargé de recherche CNRS, A. Jouanneaux, Maître de conférence, et moi-même) sont donc maintenant rétribués. Le montant global des rétributions est inférieur au revenu produit par les droits d'inscription (de 1625 à 6500 F selon la situation sociale et géographique du client). Un des vecteurs publicitaires permettant d'atteindre les clients potentiels aura été la liste de discussion (SDPD Mailing list : http://www.cristal.org/sdpd/ , co-fondée il y a deux ans avec Lachlan Cranswick) qui rassemble plus de 280 abonnés.

La pénétration d'Internet dans le quotidien du métier de chercheur se poursuit. Sur mon site Web spécialisé en cristallographie, et qui pèse maintenant environ 100Mo, la rubrique des conférences en ligne s'est enrichie cette année de mes contributions à EPDIC-7 (7th European Powder Diffraction Conference, Barcelona, 20-23 May 2000) et au «Sixth International School and Workshop of Crystallography, 22-27 January 2000, Ismailia, Egypt». Une participation au récent SIZE/STRAIN Round Robin organisé par la CPD (Commission of Powder Diffraction) de l'IUCr (Davor Balzar) est en ligne, montrant une application de mon programme ARIT.

IV-A-3 - Organisation de conférences, workshops, congrès et portes ouvertes

Les portes de mes sites Web, consacrés principalement à la diffraction par les poudres, sont ouvertes en permanence, 24 heures sur 24. Le visiteur moyen (200 par jour sur le site principal http://sdpd.univ-lemans.fr/ ; 100 par jour sur le site miroir http://www.cristal.org/) télécharge une dizaine de fichiers, soit 60000 requêtes de fichiers par mois.

IV-A-4 - Participation à des revues et ouvrages de vulgarisation (préciser le titre, diffusion et nombre d'exemplaires)

Participation épisodique à :

Titre : IUCr Commission on Powder Diffraction Newsletter
Diffusion internationale, version papier > 1200 exemplaires, version Internet accessible à : http://www.iucr.org/iucr-top/comm/cpd/Newsletters/

Titre : IUCr Newsletter
Diffusion internationale, version papier > 15000 exemplaires, version Internet accessible à : http://www.iucr.org/iucr-top/news/index.html

IV-A-5 - Presse écrite et audiovisuelle

Néant

IV-A-6 - Autres

Néant

IV-B - Partenariat et valorisation

IV-B-1 - Contrats auxquels vous avez participé (préciser votre rôle, la source et le montant)

2000 : Contrat de recherche et développement du logiciel ESPOIR
Rôle : Créateur de la première version du logiciel en 1999, concepteur et réalisateur des modifications apportées au logiciel ESPOIR dans le cadre du contrat.
Source : Dupont Company - USA
Montant : 10000 US $

2001 : Contrat de recherche et développement du logiciel ESPOIR
Rôle : Concepteur et réalisateur des modifications apportées au logiciel ESPOIR dans le cadre du contrat, en collaboration avec Florent Calvayrac réalisateur de la version pour calculateur parallèle.
Source : Dupont Company - USA
Montant : 10000 US $

2001 : Contrat pour analyses quantitatives par la méthode de Rietveld
Rôle : rédacteur du contrat, réalisateur des analyses, concepteur de la méthode d'analyse
Source : Microbiologica Quimica e Farmaceutica Ltd - Brésil
Montant : 1560 Euros pour un lot de 15 analyses, renouvelable

IV-B-2 - Création d'entreprises

La création d'un DU (Diplôme d'Université) en EAD (Enseignement à Distance) s'apparente fortement à une création d'entreprise. J'ai la signature sur les revenus de cette petite entreprise : soit environ 50KF de droits d'inscription pour 18 étudiants dans la période 1999-2001. Ce DU n'a pas coûté un sous à l'Etat ni à l'Université du Maine. La rémunération des 3 enseignants du DU est prélevée sur ces droits d'inscription. Le financement complet de la participation des 3 enseignants au congrès EPDIC-7 (Barcelone, Mai 2000) a été assuré par prélèvement sur les fonds du DU. Mais, imaginez que nous ayons 100 clients l'année prochaine… Des plaquettes publicitaires sont pévues, notamment dans les Newletters de l'IUCr.

IV-B-3 - Brevets

Néant

IV-B-4 - Consulting

Néant

IV-B-5 - Autres

Néant

IV-C - Encadrement, animation et administration de la recherche

IV-C-1 - Responsabilité dans l'animation de programmes et/ou projets français, européens et/ou internationaux (préciser le type, rôle, partenaires et montant, le cas échéant)

Membre de la commission "Crystallographic Computing" de l'IUCr (International Union of Crystallography). Dans ce cadre, un musée des codes sources (principalement Fortran) des programmes de cristallographie est disponible sur mon serveur Web : http://sdpd.univ-lemans.fr/museum/index.html. Georges Sheldrick lui-même a accepté d'y déposer les sources, toujours compilables d'ailleurs, de programmes mythiques comme SHELX-76, SHELXS-86.

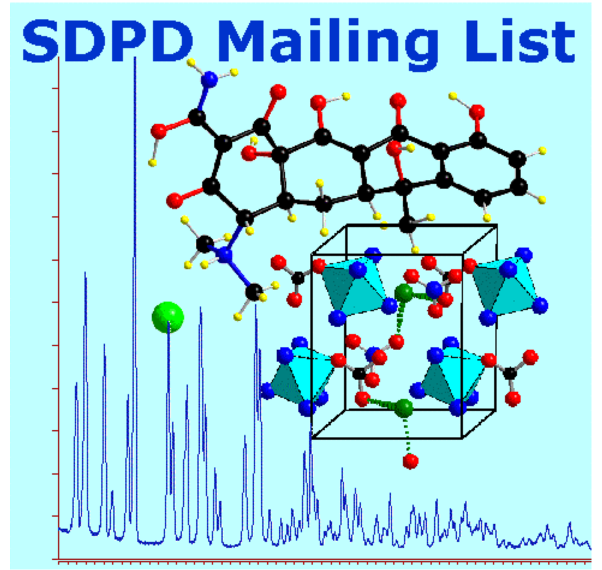
IV-C-2 - Responsabilité dans la direction d'équipes (préciser le nombre de personnes)

Un chercheur équivalent temps-plein.

IV-C-3 - Administration de la recherche et/ou fonctions d'intérêt général

Membre nommé suppléant de la Commission de Spécialistes 33ème section, chimie des matériaux, en 1999. Membre nommé titulaire en 2000, en raison de la démission du membre nommé titulaire initial.

IV-C-4 - Autres : animation de la recherche



L'époque est aussi à d'autres moyens de communication des résultats scientifiques, autrement plus rapides que les publications traditionnelles, et bien plus ouverts aux critiques. Tous les abonnés d'une liste de discussion à caractère scientifique peuvent intervenir, pas seulement deux referee anonymes. Souscrivez à la SDPD (Structure Determination by Powder Diffractometry) Mailing List http://www.egroups.com/list/sdpd/ si vous vous sentez concernés par les problèmes de détermination de structure par diffractométrie des poudres. Plus de 300 abonnés d'origine internationale, et 600 messages depuis mars 1999. Par ailleurs, j'héberge sur mon serveur Web les archives de la liste de discussion Rietveld_l, et j'en suis probablement un des participants les plus actifs http://sdpd.univ-lemans.fr/forum/rietveld_l/index.html.